

セルオートマトン法による粗面チャンネル内の
強制対流物質伝達の計算*木下 淳一*¹, 長谷 隆*²Cellular Automaton Simulation for Convective Mass Transfer
in Channel with Rough Surface

Junichi KINOSHITA and Takashi NAGATANI

The convective mass transfer in a channel with the rough surface is investigated by the use of the cellular automaton method. The Graetz problem is simulated by the cellular automaton method. It is shown that the simulation result is consistent with the analytical solution. The cellular automaton method is applied to the mass transfer problem in the channel flow with the rough surface. The local Sherwood number and bulk mean concentration are calculated. It is shown that the mass transfer rate increases with the size of roughness.

Key Words: Cellular Automaton Method, Mass Transfer, Channel Flow, Boundary Layer, Sherwood Number

1. 緒言

伝熱促進の立場からチャンネル内に突起を持つ内壁を設けるなどして伝熱の促進を図ることが行われている⁽¹⁾⁻⁽³⁾。しかし複雑な境界をもつ物体周りの解析は非常に困難である。

セルオートマトン法は流体を微小な粒子の集合と考え粒子の衝突、並進によって巨視的な流れ場をシミュレートするものである^{(4),(5)}。セルオートマトン法は差分法をはじめとする従来の数値計算法と比較して数値誤差による不安定化がなく、複雑な境界も容易に数値解析することができる。このため複雑な流れ⁽⁶⁾、特に特異点を持つ流れの解析に有効である。

セルオートマトン法を境界層問題に適用した例はあまりない。セルオートマトン法は完全に発達した平板チャンネル流れやキャビティ流れの問題⁽⁷⁾、二種類の粒子を用い重力の効果を取り入れて密閉容器内の自然対流を取り扱ったもの⁽⁸⁾、さらに表面張力を取り入れて二相流に適用したもの^{(9),(10)}がある。

しかしながら温度助走区間問題、濃度助走区間問題^{(11),(12)}に適用した例はない。そこで本研究では伝熱促進の立場から層流域における粗面チャンネル内強制対流物質伝達の計算を行う。また計算精度を確かめるために平行平板間温度助走区間問題の Graetz 問題と比較する。

本研究で取り扱った物質移動の計算は熱伝達問題と相似性が成り立つので伝熱問題に 응용が可能である。

主な記号

b	: 突起高さ
C	: 断面平均濃度
C_a	: 軸中心濃度
C_e	: チャンネル入口濃度
C_m	: バルク平均濃度
C_w	: 壁面濃度
d	: 粒子密度 ($= \rho/6$)
D	: 拡散係数
D_h	: 水力直径
h	: 物質伝達率
L	: チャンネル長さ
t	: タイムステップ

* 原稿受付 1998年11月17日。

*¹ 学生, 静岡大学大学院 (〒432-8561 浜松市城北3-5-1)。*² 正員, 静岡大学工学部。

u_m	: 平均流速
W	: チャンネル幅
x^*	: 無次元距離
θ_m	: 無次元バルク平均濃度
ν	: 動粘性係数
ρ	: 密度
Re	: レイノルズ数 ($= Wu_m / \nu$)
Sc	: シュミット数 ($= \nu / D$)
Sh	: シャーウッド数 ($= hW / D$)

2. シミュレーション方法

2.1 セルオートマトン法 セルオートマトン法は二次元の計算領域を一边が単位長さの三角格子によって離散化する(図1). 粒子は単位質量を持っており, 格子点を単位速度をもって移動する. 粒子は質量および運動量保存を満たす一定の衝突規則に従ってお互いに衝突し, 方向を変える. 衝突後, 粒子は隣接する格子点へ並進する. この衝突過程と並進過程を1タイムステップとし, これを繰り返すことにより系を時間発展させる. この粒子の状態を空間的かつ時間的に疎視化すると巨視的な流れ場となる. この流れ場は連続の式と Navier-Stokes 方程式を満たすことが知られている(4). 本研究では濃度境界層問題を取り扱うために二粒子モデルを用いる. これは二種類の粒子(以後 A 粒子と B 粒子とする)を用いて衝突, 並進させる. 二種類の粒子はそれぞれ同じ単位質量を持ち, 計算の初期

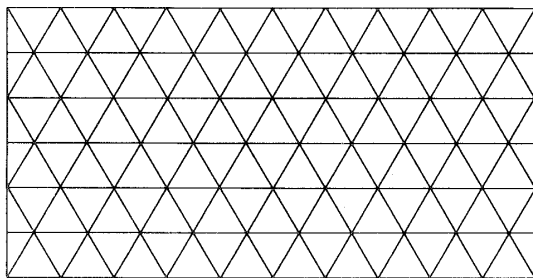


Fig.1 Domain discretization

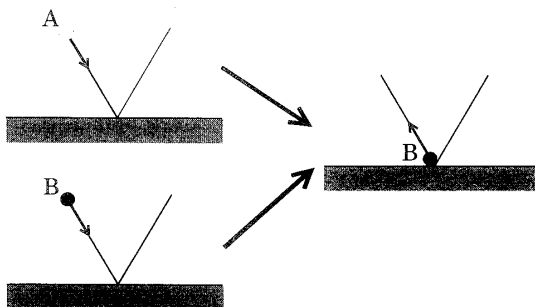


Fig.2 Boundary conditions (1) and (3)

において流れは A 粒子のみによって構成されている. 次に次節で述べる濃度一定の境界に到達すると A 粒子が B 粒子に変化する.

セルオートマトン法では流速に上限が存在し, 動粘性係数も最小値が存在する. したがってレイノルズ数を大きくするためには代表長さを大きくする必要があり. しかし大きな系で計算することは長い計算時間を要する.

2.2 境界条件 本シミュレータにおいて境界は以下に区分される.

- (1) 固体壁(すべり無し)
- (2) 上流境界と流出境界
- (3) 濃度一定境界

(1)固体壁ではすべり無しの条件を満たすように壁に入射した粒子は反対方向へ反射される. (2)上流境界と流出境界では粒子数保存を満たすために周期的境界条件とする. (3)濃度一定境界では表面で濃度一定である固体壁として取り扱う. したがって粒子の反射は(1)のときと同様に扱うが, 粒子の種類を反射する際に変化させる. 具体的には入射する粒子の種類に関わらずある一定の確率で B 粒子に変え, 残りは A 粒子に変える. 確率を 50% とすれば固体表面で B 粒子濃度 50% の濃度一定境界となる. 今回は表面における B 粒子濃度を 1 としているため反射後の粒子は全て B 粒子となる(図2). 以後濃度は B 粒子の濃度とする.

2.3 計算モデル 図3に濃度助走区間問題のモデルを示す. 粗面をもつチャンネル内の非圧縮性流れを考える. 粗面は正三角形を並べたものとする. チャンネルは十分に長く流れは完全に発達しているものとする. チャンネル内の一部に反応壁を上下に設ける. 実際の計算は反応壁を設けた領域で行う. 流体は境界に達すると反応を起こし, 別の種類の物質に変化するものとする. ここで境界上は濃度一定境界である. 二種類の流体間には表面張力は働かず, お互いに交じり合うことができるものとする. また, 両者の物性値は同じものとする. 平らな壁面の温度助走区間問題(Greatz 問題)を比較のために行う.

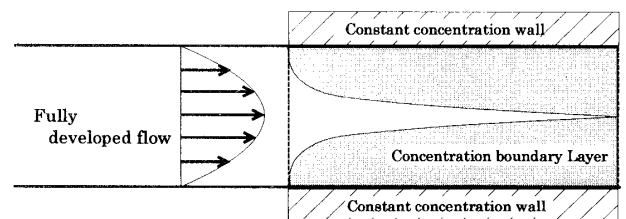


Fig.3 Model

3. 物性値の計算

セルオートマトン法において動粘性係数 ν と拡散係数 D の各物性値は粒子密度 $d (= \rho/16^{(13)})$ の関数としてあらわされる。関数は衝突則のモデルによって異なっている。しかしこの関数は理論解析の際に近似を用いている。そこで粗面チャンネル内でのシミュレーションを行う前に各物性値の値を計算する。

3.1 動粘性係数 ν セルオートマトン法において平行平板チャンネル流れの流速は放物分布であり、厳密解と一致する。これは本シミュレータで再現できることが確かめられた。本研究で用いた FHP (Frisch, Hasslacher, Pomeau) モデルにおいて動粘性係数は式 (1) で与えられる⁽¹³⁾。

$$\nu_{(d)} = \frac{1}{12d(1-d)^3} - \frac{1}{8} \quad \dots\dots(1)$$

次に実際の平行平板のシミュレーション結果から動粘性係数を算出する。セルオートマトン法において上流部と下流部における境界は周期的境界条件である。ここで系の流速は壁面摩擦による損失を受け、徐々に小さくなる。そこで上流部において一定流速を保つために各タイムステップごとに粒子に外力を作用させ流速を一定に保つ。つまり単位時間（単位タイムステップ）に失われる運動量は壁面摩擦による損失と等しい。したがって粘性係数を μ とするとチャンネル流れにおいて壁は二面あるので、

$$\frac{d}{dt}[\rho WLu] = 2L\mu \frac{du}{dy}$$

整理して、 $\frac{du}{dt} = -\Delta u$ とすると、

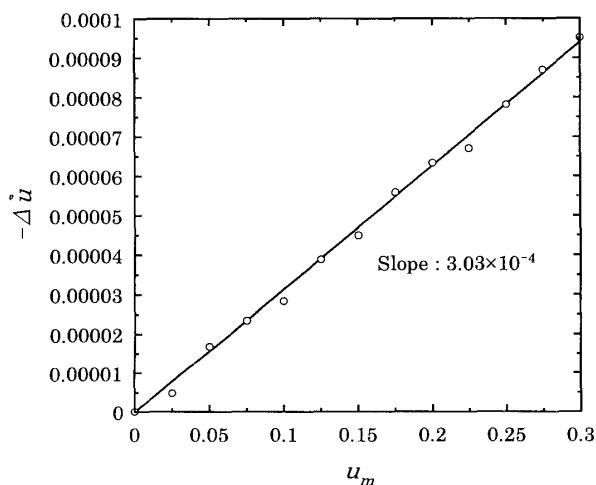


Fig.4 Velocity loss by friction ($\rho=1$)

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} = W \frac{du}{dt} / 2 \frac{du}{dy}$$

速度分布が放物型であるとすると動粘性係数 ν は u_m を平均流速として式 (2) で表わされる。

$$\nu = \frac{W^2}{16} \left(\frac{-\Delta u}{u_m} \right) \quad \dots\dots(2)$$

各タイムステップごとに失われた速度 $-\Delta u$ を計算する。シミュレーションは $W=200$, $L=200$, $\rho=1$ ($d=1/6$) で実行し、平均流速 u_m を 0 から 0.3 まで変化させた。計算は系が十分発達し、定常状態になるように $t=50000$ まで行い、その後 10000 タイムステップの平均を取った。その結果を図 4 に示す。

グラフから傾き $-\Delta u/u_m$ を求めることにより動粘性係数 ν を計算することができる。計算結果は $\nu=0.758$ である。

3.2 拡散係数 D 動粘性係数と同様に FHP モデルにおける拡散係数は粒子密度の関数として以下のように表わされる⁽¹³⁾。

$$D_{(d)} = \frac{1}{d(1-d)^3(3d+1)} - \frac{1}{4} \quad \dots\dots(3)$$

拡散係数を求めるために理論解析が可能である単純な条件でシミュレーションを行い、理論解と比較して拡散係数を求める。

厚さ L の無限平板の両表面を濃度一定に保ち、平板内の濃度変化を考える。一次元の拡散方程式は式 (4) で与えられる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \dots\dots(4)$$

これを

境界条件 $x=0$, $x=L$ で $C=0$

初期条件 $t=0$ で $C=1$

のもとで解くと解は式 (5) のようになる。

$$C = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{2n-1} e^{-\{(2n-1)\pi\}^2 \frac{Dt}{L^2}} \sin \left\{ \frac{(2n-1)\pi x}{L} \right\} \right] \quad (n=1,2,3,\dots) \quad \dots\dots(5)$$

シミュレーションの境界条件は左右の境界は滑りなし壁、濃度 $C=0$ の濃度一定境界として取り扱った。初期条件は $C=1$ 。上下の境界は自由境界を実現するために反射境界とした。シミュレーションは $W=400$, $L=400$, $\rho=1$ ($d=1/6$) で行った。 $t=100, 300, 500$ の濃度分布を図 5 に示す。拡散係数 D を求めるためにまず計算結果を理論解でカーブフィットし、その時の指数 Dt/L^2 を決定する。ここで必要十分な精度をもった関数として式 (5) の 6 次のオーダーまでを用いて近似式とした。計算結果をこの近似式を用いて最小二乗法でカーブフィットすると良い一致を示した。この中でも

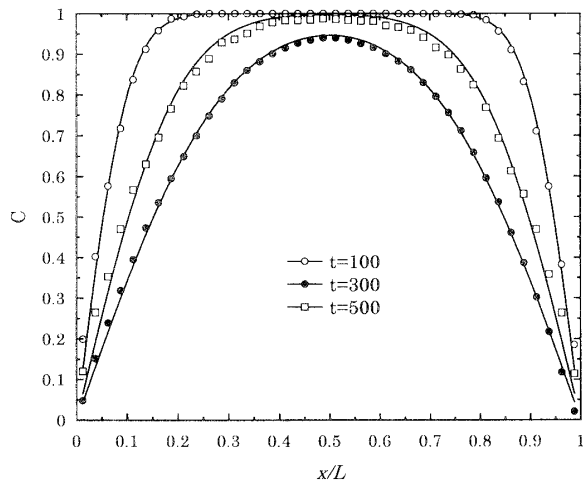


Fig.5 Time evolution of concentration profiles
($\rho = 1$)

つとも誤差の少なかった $t=500$ の場合の係数 Dt/L^2 より拡散係数を求めると $D=6.51$ である。

以上の理論式(1), (3)および計算より得られた結果を表1にまとめる。動粘性係数と拡散係数の両者とも理論値と計算結果がよく一致することが分かる。

Table 1 Comparison of theory with simulation

	theory	simulation
Kinematic viscosity ν	0.739	0.758
Diffusion coefficient D	6.66	6.51

動粘性係数は密度に依存し、一方流速に限界があるため高レイノルズ数の実現には計算領域(代表長さ)を大きくする必要がある。しかし現在の計算機ではレイノルズ数数千が限界である。同様に拡散係数も密度に依存し、本モデルにおけるシュミット数は0.07~0.2程度の値に限定される。

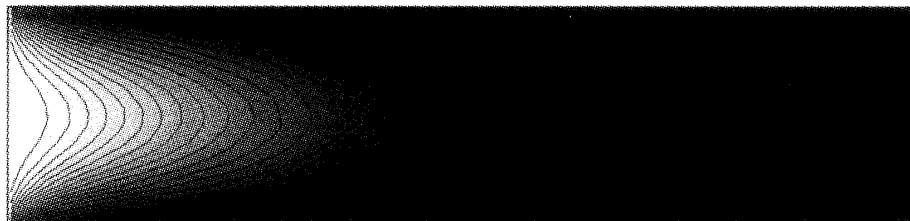


Fig.6 Concentration distribution ($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

4. Gatz 問題

セルオートマトン法の精度を確かめるために平行平板間の温度(濃度)助走区間問題である Gatz 問題について計算を行う。計算領域は長さ $L=1600$ 、幅 $W=400$ のチャンネルで管路壁は滑らかな等濃度壁とし、流れ方向は周期的境界条件とした。ここで出口部に到達した B 粒子は入口部に戻る際に A 粒子に変化させる。これによって入口部での B 粒子濃度を 0 にする。また入口部で流れは十分に発達しているものとみなし、流速は放物分布であるとする。

図6に計算結果の等濃度線図を示す。計算条件は壁面濃度 $C_w=1.0$ 、平均流速 $u_m=0.2$ 、流体密度 $\rho=1.0$ である。したがって $Re=106$ 、 $Sc=0.116$ である。計算は濃度分布が十分に発達するように $t=40000$ まで行い、その後 $t=70000$ までの 30000 タイムステップにわたって平均した。等濃度線図を描く際には 10×10 の領域で疎視化を行っている。

これから壁の入口部を先端として濃度境界層が発達している様子が分かる。

次に解析解との比較を行う。Gatz 問題のバルク平均温度、およびシャーウッド数は Gatz 数の関数とし

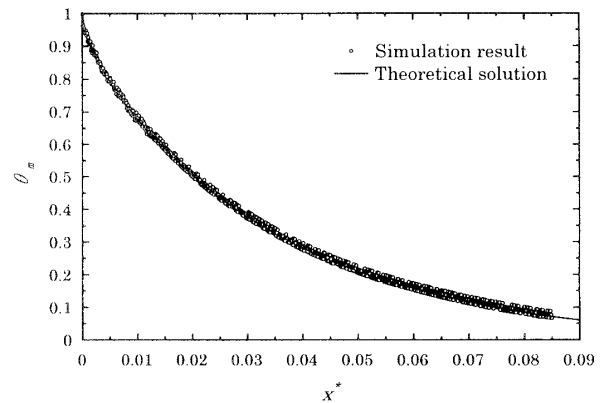


Fig.7 Fluid bulk mean concentration v.s dimensionless distance ($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

て解析的に求められている(14),(15). 無次元バルク平均濃度 θ_m と無次元距離 x^* を以下のように定義する.

$$\theta_m = \frac{C_m - C_w}{C_e - C_w} \quad \dots\dots(6)$$

$$x^* = \frac{x}{D_h \text{Re} Sc} \quad \dots\dots(7)$$

ここで C_m は断面で平均したバルク濃度である.

計算結果を図7に示す. プロットが計算結果, 曲線が解析結果(14)である. この図からセルオートマトン法による結果は解析結果と非常に良く一致することが分かる.

次に壁面上での局所シャーウッド数 Sh_x を求める.

局所シャーウッド数は壁面上における濃度勾配の関数として式(8)のように定義される(15).

$$Sh_x = \frac{g_x D_h}{D(C_w - C_{m,x})} \quad \dots\dots(8)$$

ここで $g_x = D \frac{\partial C}{\partial y}$ である.

また D_h は水力直径である.

このようにして求めたシャーウッド数を図8に示す. プロットは計算結果で曲線は解析解(14)である. この結

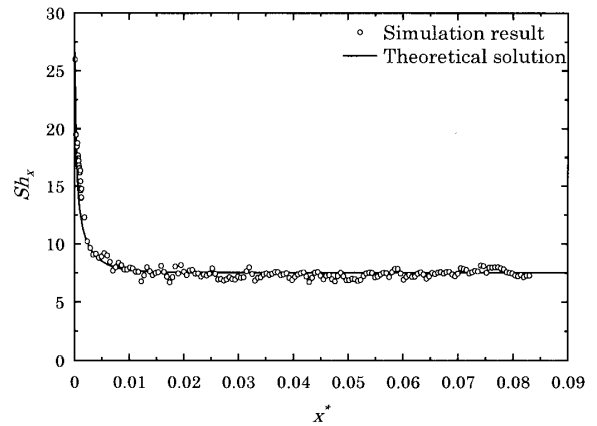


Fig.8 Local Sherwood number Sh_x on flat channel ($\text{Re} = 106, Sc = 0.116$)

果からも解析解と計算結果は良く一致した. 以上からセルオートマトン法は物質伝達のシミュレーションに有効であることが示された.

5. 粗面チャンネル内の物質伝達

物質伝達を促進するためにチャンネル内壁に三角形の突起をジグザグに付けて計算を行った. 三角形は

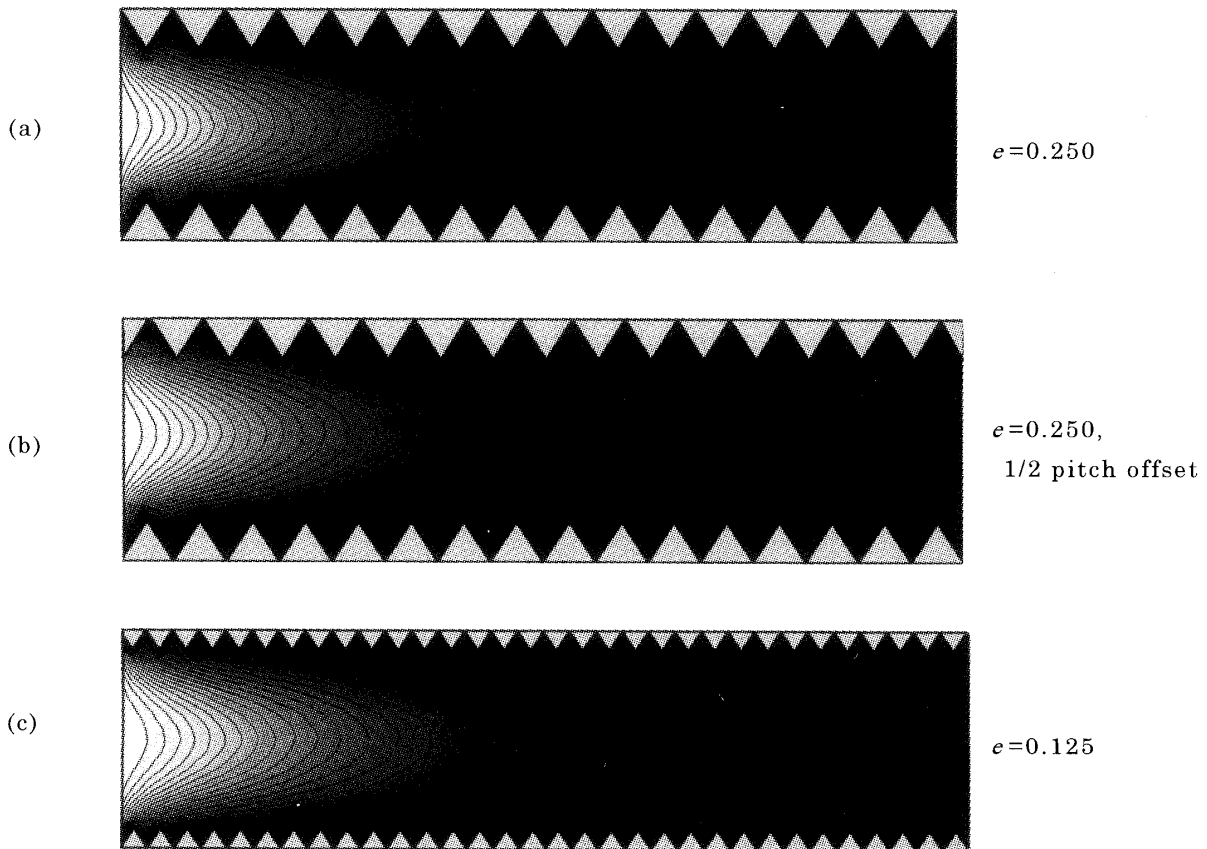
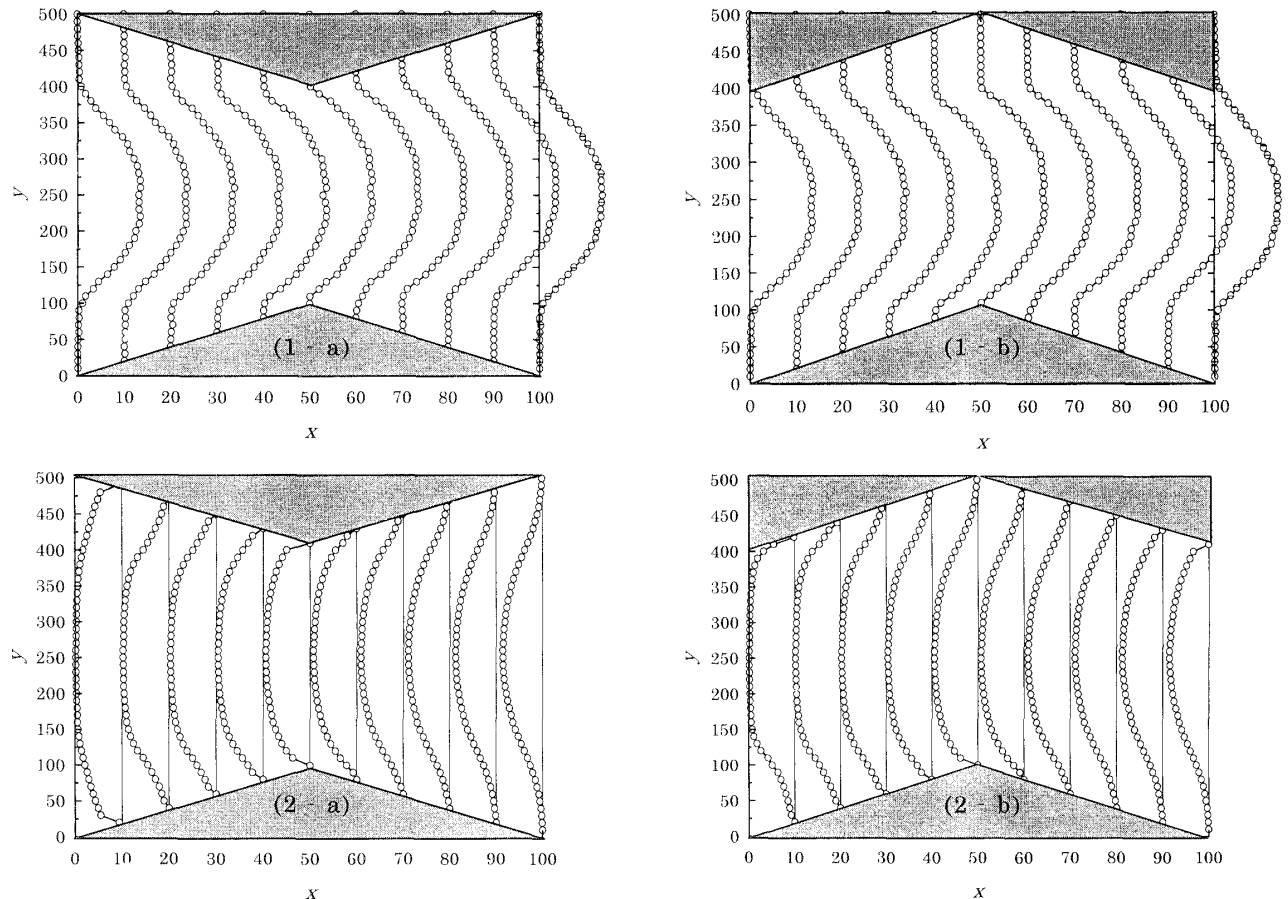


Fig.9 Concentration distributions ($\text{Re} = 106, Sc = 0.116$)

Fig.10 Velocity and concentration profiles near entrance ($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

正三角形とした。計算は $t = 40000$ まで行い、その後 $t = 70000$ までの 30000 回平均した。計算条件は壁面濃度 $C_w = 1.0$ 、平均流速 $u_m = 0.2$ 、流体密度 $\rho = 1.0$ 、 $Re = 106$ 、 $Sc = 0.116$ である。

計算領域は $L = 1600$ で幅は上下の三角形の中心間距離を 400 とした。粗面の粗さを以下のように定義する。

$$e = b/W \quad \dots\dots(9)$$

ここで b は突起の高さである。計算は $e = 0.250$ 、 0.250 で片面を半ピッチずらしたもの、 $e = 0.125$ の 3 種類で行った。図 9 は計算結果の等濃度線図である。(a) は $e = 0.250$ (b) は $e = 0.250$ 半ピッチずらし (c) は $e = 0.125$ である。平滑チャンネルの結果に比べて (a) は濃度境界層が発達するのが早いことが分かる。これによって三角形の突起が物質伝達促進に有効であることが分かる。(c) の結果はより平滑チャンネルの結果と似ている。また (b) の結果は (a) の結果と良く似ている。

図 10 は速度分布図と濃度分布図である。(1-) は速度分布、(2-) は濃度分布、(1-a) は $e = 0.250$ 、(1-b) は $e = 0.250$ 半ピッチずらしである。全計算領域のうち入口部の長さ 100 を取り出し、見やすくするために x 方向に拡大して表示した。(1-a)、(1-b) から突起の内部

は流れが無く、ほぼ死水領域となっていることが分かる。また両者に大きな違いは見られない。(2-a) と (2-b) から突起の配列で濃度分布は大きく異なっており三角形の頂点で濃度勾配が大きくなっていることが分かる。これから頂点部におけるシャーウッド数が大きいことが予想される。

次に定量的な比較に移る。まず濃度分布を比較する。図 11 はチャンネル中心部の濃度分布であり、図 12 は断面平均した濃度である。これから突起が大きくなるほど濃度が高くなり、物質移動が活発になることが分かる。また半ピッチずらしでも濃度分布に大きな違いは見られない。

次に無次元バルク平均濃度 θ_m を比較する。図 13 に計算結果を示す。プロットはそれぞれ突起を持つチャンネルで曲線は平滑チャンネルの解析解である。この結果から等濃度線図では分からなかった特徴が良く分かる。全体的に突起を持ったものの方が θ_m は低い (濃度は高い) ことが分かる。また $e = 0.25$ の場合と $e = 0.125$ の場合、のこぎり状の曲線となる。そのピークは突起の最低部と一致している。これは突起内部の濃度が非常に高いことによると思われる。 $e = 0.25$ で通常と半ピ

ツチずらした結果を比較すると値そのものはあまり変わらないが半ピッチずらした方は滑らかな曲線を描く。これは下側の壁面が頂点のとき上側は底になっているので断面で平均をとるとお互いに局所的な濃度の偏りを打ち消し合ったものと考えられる。

壁面上における局所シャーウッド数 Sh_x の計算結果を図 14-16 に示す。図 14 は $e=0.250$ の結果である。平滑チャンネルの場合 Sh_x は入口部で最大値をとり、以降は減少するだけであった。しかし突起を持たせると入口部での Sh_x はあまり平滑チャンネルと変化はないが下流に向かうにつれて急激に増加し、三角形の頂点において極大値をとる。その後減少し、また次の頂点で極大となる。これから特異点となっている頂点部で物質移動が活発に行われていることが分かる。図 15 は $e=0.250$ 半ピッチずらしの結果である。 $e=0.250$ と比較すると差はほとんど見受けられない。これは両者の速度分布に差が無かったためであると思われる。図 16 は $e=0.125$ の結果である。 $e=0.250$ と比べて全体的にシャーウッド数は低いと同様の傾向が見られる。

壁面摩擦を計算した結果粗面チャンネルの場合、平滑チャンネルと比較して大きくなるが、表面粗さがチャンネル幅に対して十分小さくなると表面粗さによらず摩擦損失(管摩擦係数)は平滑チャンネルの結果とほぼ同じになり、層流域での粗面管の管摩擦係数が表面粗さによらないという結果と一致する。

セルオートマトン法では三角形を組み合わせた表面形状に対する計算しかできないが、計算領域を大きくとり、表面を数多くの三角形で近似することによって任意の表面形状を実現することが可能である。

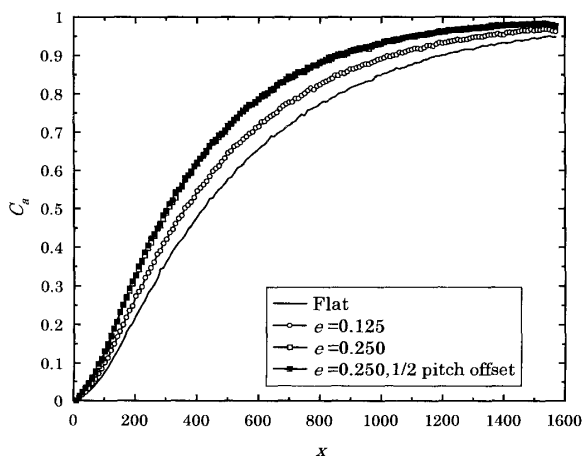


Fig.11 Concentration at channel center
($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

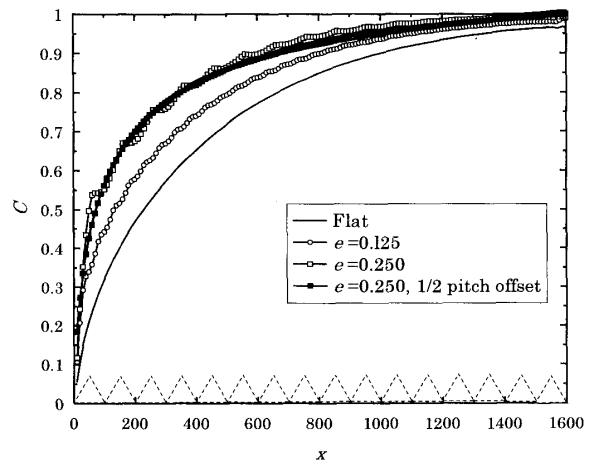


Fig.12 Average concentration over cross section
($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

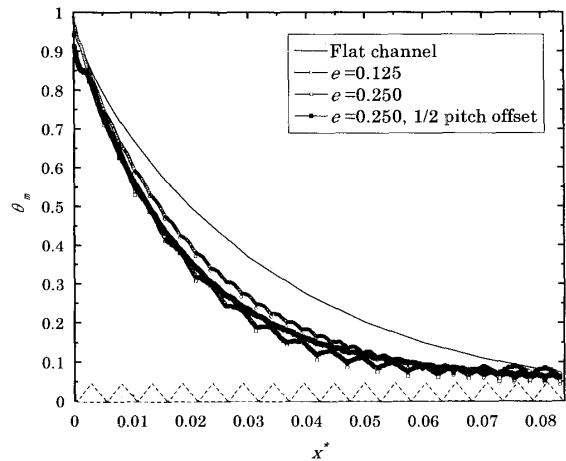


Fig.13 Fluid bulk mean concentration
($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

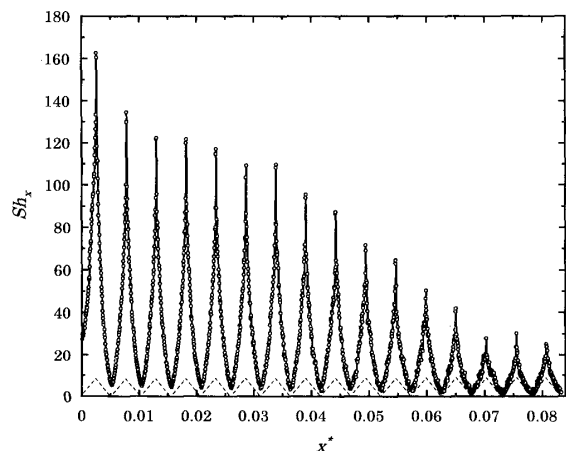


Fig.14 Local Sherwood number $e=0.250$
($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

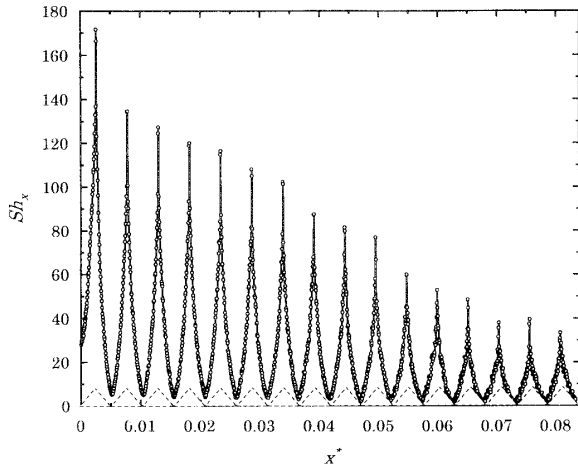


Fig.15 Local Sherwood number for $e=0.250$ half pitch offset ($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

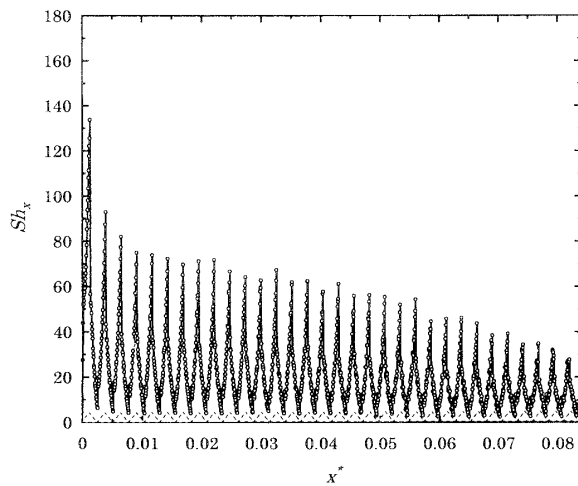


Fig.16 Local Sherwood number for $e=0.125$ ($Re = 106$, $Sc = 0.116$)

6. 結言

セルオートマトン法を濃度境界層問題に適用し、粗面チャンネル内の強制対流物質伝達の計算を行い以下の結論を得た。

- ・セルオートマトン法によって動粘性係数と拡散係数を算出し、理論値と一致することを確認した。
- ・Greatz問題を計算し、その結果バルク平均濃度、局所シャーウッド数、共に理論解析と良く一致することを確認した。
- ・従来の差分法などが不得意とする特異点を持つ流れである粗面チャンネル内の計算を行い、セルオートマトン法が有効であることを示した。

- ・濃度助走区間問題の入口特異点付近における物質伝達を比較的精度良く計算することができた。
- ・粗面チャンネル内の計算からバルク平均濃度は平滑チャンネルに比べて高く、三角形の突起が物質移動を促進することを定量的に示した。
- ・粗面の壁面上の局所シャーウッド数は非常に高く、特に壁面の頂点において極大値となり、特異点において物質伝達が活発になることが分かった。

文献

- (1) Grainer, M., ほか 2 名, ASME J. of Heat Transfer, Vol 112 No.2 (1990), 336-341.
- (2) Grainer, M., Int. J. of Heat Mass Transfer, Vol 34 No.6 (1991), 1383-1391.
- (3) Goldstein, L. Jr. and Sparrow, E. M., ASME J. of Heat Transfer, Vol 112 No.2 (1990), 336-341.
- (4) Frisch, U., ほか 5 名, Complex syst., 1(1987), 649-707.
- (5) 渡辺・高橋, 機論, 63-609, B(1997), 1604-1611.
- (6) 松隈・ほか 3 名, 機論, 64-622, B(1998), 1617-1622.
- (7) 吉沢・高橋, 機論, 57-540, B(1991), 2663-2670.
- (8) 小林・高橋, 機論, 57-540, B(1991), 2671-2677.
- (9) Rothmann, H. and Keller, J. M., J. Stat. Phys., 52(1988), 1119-1127.
- (10) 松隈・高橋, 機論, 61-589, B(1995), 47-54.
- (11) Naito, E. and Hishida, M., Nagoya Kogyu Daigaku Gakuho, 24 (1972), 143-151.
- (12) Naito, E., Heat Transfer-Jpn. Res., 4-2, (1975), 63-74.
- (13) Burges, C. and Zaleski, S., Complex Syst., 1 (1987), 31-50.
- (14) Shah, R. K., Natl. Proc. Heat Mass Transfer Conf., 3rd, Indian Inst. Technol., Bombay, Vol. 1, (1975), Pap. No. HMT-11-75.
- (15) Shah, R. K. and London, A. L., Advances in Heat Transfer Supplement 1, p. 153-197, (1978), Academic Press.